第 38 卷 第 6 期 江西师范大学学报(自然科学版) Vol. 38 No. 6
2014 年 11 月 Journal of Jiangxi Normal University(Natural Science) Nov. 2014

文章编号:1000-5862(2014)06-0569-05

基于模型函数与 L-曲线的正则化参数选取方法

胡 彬[1],徐会林[2],王泽文[1],喻建华[1]

(东华理工大学理学院,江西 南昌 330013;2. 河南理工大学数学与信息科学学院,河南 焦作 454000)

摘要:基于模型函数方法与修正的 L-曲线准则,给出了选取正则化参数的 1 种迭代算法. 在一定条件下,证明了所提出的选取正则化参数的算法是局部收敛的,通过数值算例验证了该方法的局部有效性.

关键词:L-曲线准则;正则化方法;正则化参数;模型函数

中图分类号:O 241.8;O 241.6 **文献标志码**:A

0 引言

反问题研究已是计算数学及应用数学领域研究的热点问题之一. 反问题一般是不适定的[1],其不适定性在数值计算上表现为解不连续依赖测量数据. 即使在实际测量过程中测量误差非常小,也会引起解的巨大波动. 目前求解不适定问题最具有普遍性、完备性的是 Tikhonov 正则化方法,但该方法的有效性取决于选取到合适的正则化参数. 目前比较有代表性的正则化参数选取策略有:Morozov 偏差原理、广义交叉检验、L-曲线(L-curve)等准则. 当误差水平已知或可估计时,Morozov 偏差原理是最常采用的正则化参数选取策略之一,但是当不适定算子方程右端项的误差水平 δ 未知时,Morozov 偏差原理就失效了. 为了克服 Morozov 偏差原理需要已知误差水平的局限性,P. C. Hansen 等提出基于 L-曲线的正则化参数选取方法[2-3],可以在误差水平未知的情形下找到近似最佳的正则化参数.

在利用 Morozov 偏差原理确定正则化参数时需要借助牛顿迭代,而牛顿迭代的计算量比较大,为了克服这一缺点,文献[4-7]中提出了 1 种新的确定正则化参数的方法—模型函数法. 它是将 Tikhonov 泛函定义为关于 α 的函数,再用 1 个简单的具有显示表达式的模型函数来近似 $F(\alpha)$,通过简单迭代确定正则化参数.

本文在上述 2 种方法的基础上研究了基于模型函数的修正 L-曲线准则,证明了所得序列点是局部收敛的,给出了相应的迭代算法. 通过算例验证了该准则的有效性,同时也指出了目前还存在的不足和今后进一步研究的方向.

1 模型函数法

线性反问题一般可归结为解第 1 类不适定算子方程:

$$Kx = y, \tag{1}$$

其中 K 是 Hilbert 空间 X 到 Y 上的有界线性算子. 由于观测数据存在误差,所以一般把方程(1)改写为

$$Kx = y_\delta, y_\delta \in Y, \tag{2}$$

其中 δ 为误差水平,$\| y_\delta - y \| \leqslant \delta$. Tikhonov 正则化方法是将求不适定方程(2)的解转为求 Tikhonov 泛函

$$J_\alpha(x) = \| Kx - y_\delta \|^2 + \alpha \| x \|^2 \tag{3}$$

的最优解,其中 $\alpha > 0$ 是正则化参数. 对于固定的正则化参数 α,记最优函数为

$$F(\alpha) = \min_{x \in X} J_\alpha(x) = \| Kx(\alpha) - y_\delta \|^2 + \alpha \| x(\alpha) \|^2.$$

引理1[4] 设 $K: X \to Y$ 是有界线性算子,X, Y 均为 Hilbert 空间. $\forall \alpha > 0$,(3)式的唯一解 $x(\alpha)$ 是无穷次可微的,且 $g = \mathrm{d}^n x(\alpha) / \mathrm{d}\alpha^n \in X$ 可由

$$\alpha g + K^* Kg = -n \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}\alpha^{n-1}} x(\alpha), n = 1, 2, \cdots$$

递推求解得到.

收稿日期:2014-10-20

基金项目:国家自然科学基金(11161002),江西省青年科学基金(20132BAB211014)和江西省教育厅科技课题(GJJ13460)资助项目.

作者简介:胡 彬(1982-),女,江西南丰人,讲师,主要从事数学物理方程反问题理论及计算研究.

定理1[4-5] 最优函数$F(\alpha)$在$(0,+\infty)$内是无限次可微的,且$\forall\alpha>0$,$F(\alpha)$满足

$$F(\alpha)+\alpha F'(\alpha)+\|Kx(\alpha)\|^2=\|y_\delta\|^2. \quad (4)$$

模型函数的方法就是在α_k附近构造$F(\alpha)$的局部近似函数$F_k(\alpha)$,使其满足微分方程(4),即

$$F_k(\alpha)+\alpha F'_k(\alpha)+\|Kx(\alpha)\|^2=\|y_\delta\|^2. \quad (5)$$

若假设$\|Kx(\alpha)\|^2\approx T_k\|x(\alpha)\|^2$,代入(5)式并注意到$F'(\alpha)=\|x(\alpha)\|^2$,解得

$$F_k(\alpha)=\|y_\delta\|^2+C_k/(T_k+\alpha),$$

即得到双曲模型函数:

$$m_1(\alpha)=\|y_\delta\|^2+C/(T+\alpha).$$

由于$Kx(\alpha)\approx y_\delta$,故可设$\|Kx(\alpha)\|^2\approx\|y_\delta\|^2-T_k$,代入(5)式得

$$F_k(\alpha)+\alpha F'_k(\alpha)+\|y_\delta\|^2-T_k=\|y_\delta\|^2. \quad (6)$$

解微分方程(6),得$F_k(\alpha)=T_k+C_k/\alpha$,其中$C_k$、$T_k$是待定参数且由方程组

$$\begin{cases}m(\alpha_k)=T_k+C_k/\alpha_k=F(\alpha_k)\\ m'(\alpha_k)=-C_k/\alpha_k^2=F'(\alpha_k)\end{cases} \quad (7)$$

确定,即

$$\begin{cases}C_k=-\alpha_k^2F'(\alpha_k)=-\alpha_k^2\|x(\alpha_k)\|^2,\\ T_k=\|Kx(\alpha_k)-y_\delta\|^2+2\alpha_k\|x(\alpha_k)\|^2,\end{cases}$$

于是,得到更为简洁的双曲模型函数:

$$m_2(\alpha)=T+C/\alpha.$$

文献[8]研究了非精确数据下的线性模型函数选取正则化参数. 虽然线性模型函数具有计算简单、收敛性较好等优点,但是却不能将它与L-曲线准则相结合而得到选取正则化参数的算法. 文献[9]将双曲模型函数$m_1(\alpha)$应用于L-曲线选取准则获得选取正则化参数的新算法. 本文是前述研究的继续和深入,基于双曲模型函数$m_2(\alpha)$研究修正的L-曲线选取准则,从而获得选取正则化参数选取的新方法.

2 修正的L-曲线准则

L-曲线准则是残差$\|Kx(\alpha)-y_\delta\|^2$与正则化解$\|x(\alpha)\|^2$在一组正则化参数下所构成的图像,也就是由$(\|Kx(\alpha)-y_\delta\|^2,\|x(\alpha)\|^2)$所构成的平面曲线. 最优的正则化参数$\alpha$出现在曲线的拐点处. 通常转化为对应的$(2\log\|Kx(\alpha)-y_\delta\|,2\log\|x(\alpha)\|)$曲线,因为曲线形状如字母L(见图1),故称为L-曲线准则. 从图像上很容易找到曲线的拐点,即最优正则化参数α在对应曲线的“角点”出现. 记

$u(\alpha)=2\log\|Kx(\alpha)-y_\delta\|$,$v(\alpha)=2\log\|x(\alpha)\|$,则L曲线上各点的曲率公式[10-11]为

$$k(\alpha)=2[u''(\alpha)v'(\alpha)-u'(\alpha)v''(\alpha)]/[u'(\alpha)^2+v'(\alpha)^2]^{3/2}, \quad (8)$$

曲率最大的点对应正则化参数即为所需正则化参数.

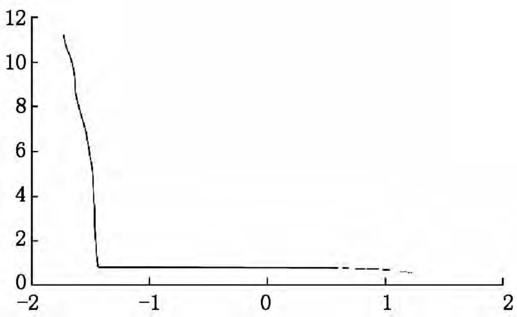

图1 L-曲线示意图

由文献[12]知,若L-曲线在点$\alpha=\alpha^*$处取到最大曲率,且在该点处曲线的斜率为$-1/\mu$,则下列泛函:

$$\overline{\omega}(\alpha)=\|Kx(\alpha)-y_\delta\|^2\|x(\alpha)\|^{2\mu},\mu>0$$

在$\alpha=\alpha^*$处取得极小值. 因此,选取正则化参数的L-曲线准则等价为求泛函(8)的极小值点. 修正的L-曲线准则就是通过求(8)的极小值来获得合适的正则化参数. 由于$\overline{\omega}(\alpha)$是$\alpha$的非线性隐式函数,不便于计算. 本文利用模型函数的方法将(8)式显化,从而简化计算,提高计算效率.

3 基于模型函数的修正L-曲线算法

对于任意给定的$\alpha>0$,最优函数$F(\alpha)$为

$$F(\alpha)=\|Kx(\alpha)-y_\delta\|^2+\alpha\|x(\alpha)\|^2 \quad (9)$$

且$F'(\alpha)=\|x(\alpha)\|^2$,则(8)式可改写成$F(\alpha)$的形式,即

$$\overline{\omega}(\alpha)=(F(\alpha)-\alpha F'(\alpha))(F'(\alpha))^\mu,\mu>0. \quad (10)$$

模型函数$m(\alpha)$是$F(\alpha)$的局部近似,则(9)式的局部近似为

$$\omega(\alpha)=(m(\alpha)-\alpha m'(\alpha))(m'(\alpha))^\mu,\mu>0.$$

本文主要研究了双曲模型函数$m_2(\alpha)$,代入(10)式得$\omega(\alpha)=(T+2C/\alpha)(-C/\alpha^2)^\mu$.

对$\omega(\alpha)$求导,得

$$\omega'(\alpha)=\frac{-C^\mu}{\alpha^{2\mu+2}}[-2C+(\alpha T+2C)(-2\mu)],$$

令$\omega'(\alpha)=0$,解得$\alpha=-C(1+2\mu)/(\mu T)$.

对于正则化参数α_k,求得对应的正则化解$x(\alpha_k)$,再根据方程组(7)可确定参数C_k,T_k,则

$$\alpha_{k+1} = -C_k(1+2\mu)/(\mu T_k). \tag{11}$$

由(11)式及 $C_k<0$,$T_k>0$ 知 $\alpha_{k+1}>0$ 且它是唯一的. 该算法比文献[9]中的更为简单,因为文献[9]给出的是关于 α 的 2 次方程,选取其中较大的作为正则化参数 α_{k+1}.

综合上面分析,得到基于双曲模型函数 $m_2(\alpha)$ 与修正的 L-曲线正则化参数选取策略的新算法:

算法 1　给定 $\varepsilon>0$,y_δ,K,$\mu>0$;

Step 1　给定 1 个初始值 $\alpha_0>\alpha^*$,置 $k=0$;

Step 2　解正则化方程 $\alpha_k x + K^* Kx = Ky_\delta$;

Step 3　求出 C_k,T_k,α_{k+1};

Step 4　当 $|(\alpha_{k+1}-\alpha_k)/\alpha_k| \leqslant \varepsilon$ 成立转 Step 5,否则置 $k=k+1$ 转 Step 2;

Step 5　停止迭代,输出正则化参数 α_{k+1}.

定理 2　如果

$$\mu\|Kx(\alpha_k)-y_\delta\|^2 > \alpha_k\|x(\alpha_k)\|^2, \tag{12}$$

则在算法 1 中函数 $\omega_k(\alpha)$ 在点 α_k 处是局部严格单调递减的.

证　算法 1 中产生的函数 $\omega_k(\alpha)$ 为

$$\omega_k(\alpha) = (T_k + 2C_k/\alpha)(-C_k/\alpha^2)^\mu,$$

则 $\omega_k'(\alpha) = (-C_k)^\mu(-2C_k + (\alpha T_k + 2C_k)\cdot(-2\mu))/\alpha^{2\mu+2}$. 取 $\alpha=\alpha_k$,把(7)式中解得 C_k,T_k 的表达式代入得

$$\omega_k'(\alpha_k) = \frac{2\|x(\alpha_k)\|^{2\mu}}{\alpha_k}(\alpha_k\|x(\alpha_k)\|^2 - \mu\|Kx(\alpha_k)-y_\delta\|^2).$$

由已知条件得 $\omega_k'(\alpha_k)<0$,即函数 $\omega_k(\alpha)$ 在点 α_k 处是局部严格单调递减的.

定理 3　给定初始值 α_0 满足(12)式,则算法 1 产生严格单调递减序列 $\{\alpha_k\}$ 且收敛.

证　由定理 2 的证明过程知,

$$\omega_k'(\alpha_k) = \frac{(-C_k)^\mu}{\alpha_k^{2\mu+2}}(-2C_k + (\alpha_k T_k + 2C_k)(-2\mu)) < 0.$$

令 $\varphi(\alpha) = -2C_k + (\alpha T_k + 2C_k)(-2\mu)$,显然 $\varphi(\alpha_k)<0$,$\varphi'(\alpha_k)<0$. 所以函数 $\varphi(\alpha)$ 是严格单调递减的. 由算法 1 知 $\varphi(\alpha_{k+1})=0$,所以 $\alpha_k>\alpha_{k+1}$. 又 $\forall k$ 均有 $\alpha_k>0$,故收敛性成立.

4　数值算例

例 1　求解第 1 类 Fredholm 积分方程[13]:

$$\int_0^1 K(s,t)x(s)\,\mathrm{d}s = y(t),\ -2\leqslant t\leqslant 2, \tag{13}$$

其中,核 $K(s,t) = 1/[1+100(t-s)^2]$,

$$x(s) = \frac{\exp\left(-\frac{(s-0.3)^2}{0.03}\right)+\exp\left(-\frac{(s-0.7)^2}{0.03}\right)}{0.955\,040\,8} - 0.052\,130\,913.$$

本文用等距节点复化梯形公式来离散第 1 类 Fredholm 积分方程(13),得线性方程组 $A\bar{x}=\bar{y}$,其中把积分核 $K(s,t)$ 离散成矩阵 $A_{m\times n}$,$x(s)$ 离散成 n 维列向量 $\bar{x}$. 对方程组右端加入随机扰动为

$$\boldsymbol{y}_\delta = \bar{y} + \delta r(n)\bar{y},$$

其中 r 为 Matlab 中的随机函数. 取不同的误差值 δ,求出对应不同误差值 δ 的正则化参数,并把不同正则化参数求出的正则化解对比(见图 2 ~ 4),其中实线表示无扰动下的精确解,星形线表示不同正则化参数下的数值近似解.

情形 1　当 $\delta = 5.837\,8\mathrm{e}-4$,$\alpha = 3.732\,0\mathrm{e}-4$,正则化解的相对误差 $\rho = 0.067\,8$. 正则化解与真解如图 2 和图 3 所示,其中图 2 是该情形下未作正则化处理的计算所得解(即当 $\alpha=0$ 时的最小二乘解),图 3 为算法 1 计算所得解.

情形 2　当 $\delta = 8.540\,1\mathrm{e}-8$,$\alpha = 6.647\,0\,\mathrm{e}-4$,正则化解的相对误差 $\rho = 0.050\,0$,算法 1 计算结果如图 4 所示.

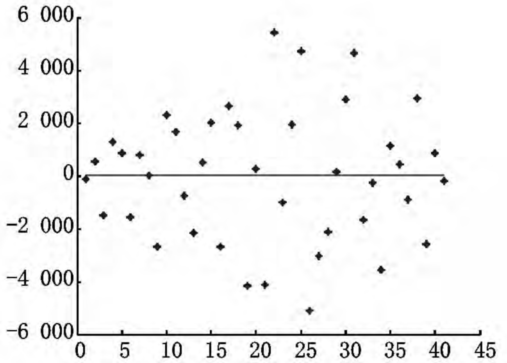

图 2　$\alpha = 0$

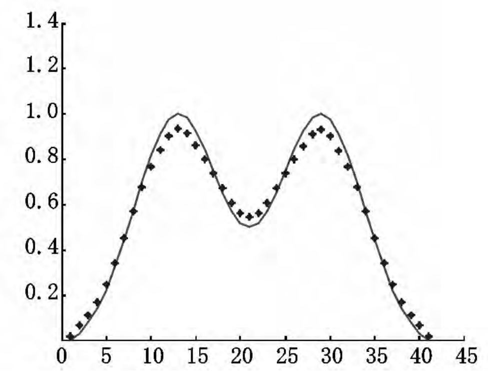

图 3　$\alpha = 3.732\,0\mathrm{e}-4$

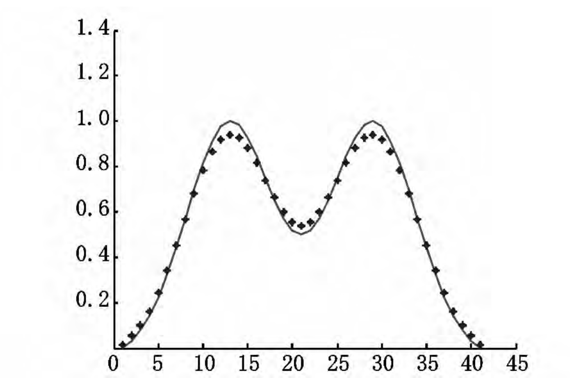

图 4 $\alpha = 6.6470\mathrm{e}-4$

例 2 求解第 1 类 Fredholm 积分方程[14-15]:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} K(s,t)\,x(s)\,\mathrm{d}s = y(t),\ -\frac{\pi}{2} \leqslant t \leqslant \frac{\pi}{2},$$

$x(s) = a_1 \mathrm{e}^{-c_1(s-t_1)^2} + a_2 \mathrm{e}^{-c_2(s-t_2)^2}$, $a_1 = 2$, $a_2 = 1$, $c_1 = 6$, $c_2 = 2$, $t_1 = 0.8$, $t_2 = -0.5$, $K(s,t) = (\cos(s) + \cos(t))^2(\sin(u)/u)$, $u = \pi\sin(s)$.

情形 1 当 $\delta = 0.0022$, $\alpha = 0.0470$ 时,正则化解的相对误差 $\rho = 0.1746$. 正则化解与真解如图 5 和图 6 所示,其中图 5 是未作正则化处理的计算所得解,图 6 为算法 1 计算所得解.

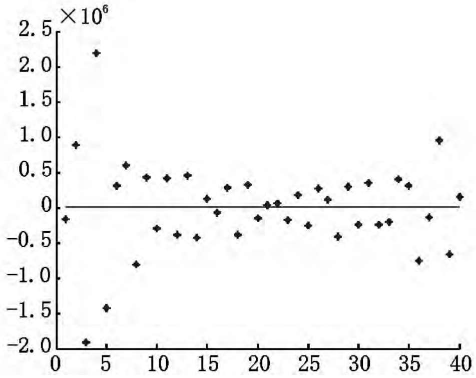

图 5 $\alpha = 0$

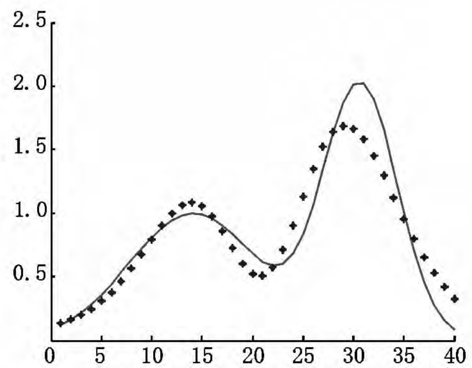

图 6 $\alpha = 0.0470$

情形 2 当 $\delta = 2.2268\mathrm{e}-5$, $\alpha = 0.0466$ 时,正则化解的相对误差 $\rho = 0.1744$,算法 1 计算结果如图 7 所示.

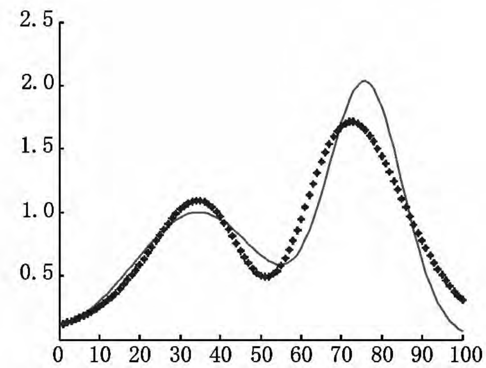

图 7 $\alpha = 0.0466$

5 结论

本文基于模型函数方法研究了正则化参数选取的修正 L-曲线准则,使得计算上更加简单. 从算例的模拟结果可以看出,基于双曲模型函数 $m_2(\alpha)$ 的所得修正后的 L-曲线准则是有效的. 但是,本文只证明了初始正则化参数选取满足一定前提条件下,算法 1 产生的序列是局部收敛的. 对于是否存在全局收敛性的算法[16],还有 μ 值选取原则等问题还需进一步研究.

6 参考文献

[1] 刘继军. 不适定问题的正则化方法及应用 [M]. 北京: 科学出版社,2005.

[2] Hansen P C,O'Leary D P. The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems [J]. SIAM J Sci Comput,1993,14(6):1487-1503.

[3] Hansen P C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve [J]. SIAM Review,1992,34(4):561-580.

[4] Xie Jianli,Zou Jun. An improved model function method for choosing regularization parameters in linear inverse problems [J]. Inverse Problems,2002,18(5):631-643.

[5] 王泽文,徐定华. 线性不适定问题中选取 Tikhonov 正则化参数的线性模型函数方法 [J]. 工程数学学报,2013,30(3):451-466.

[6] Wang Zewen,Liu Jijun. New model function methods for determining regularization parameters in linear inverse problems [J]. Applied Numerical Mathematics,2009,59(10):2489-2506.

[7] Wang Zewen. Multi-parameter Tiknonov regularization and model function approach to the damped Morozov principle for choosing regularization parameters [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics. 2012,236(7):

1815-1832.
[8] 胡彬，夏赟，喻建华. 算子非精确条件下确定正则化参数的一种方法 [J]，江西师范大学学报：自然科学版，2014，38(1)：65-69.
[9] Heng Yi，Lu Shuai，Mhamdi A，et al. Model functions in the modified L-curve method-case study：the heat flux reconstruction in pool boiling [J]. Inverse Problems，2010，26(5)：1-13.
[10] 张立涛，李兆霞，张宇峰，等. 结构识别计算中基于 L-曲线的模型确认方法研究 [J]. 运动与冲击刊，2011，30(11)：36-41.
[11] 王宏志，赵爽，胡艳君. 基于 L-曲线正则化的 MAP 超分辨率图像复原 [J]. 吉林大学学报：理学版，2008，46(2)：275-278.
[12] Reginska T. A regularization parameter in discrete ill-posed problems [J]. SIAM J Sci Comput，1996，17(3)：740-749.
[13] 樊树芳，马青华，王彦飞. 算子及观测数据都非精确情况下一种新的正则化参数选择方法 [J]. 北京师范大学学报：自然科学版，2006，42(1)：25-31.
[14] 王彦飞. 反问题的计算方法及应用 [M]. 北京：高等教育出版社，2007.
[15] 郭文彬. 奇异值分解及其广义逆理论中的应用 [M]. 北京：中国科学院研究生院，2003.
[16] 高炜，朱林立，梁立. 基于图正则化模型的本体映射算法 [J]. 西南大学学报：自然科学版，2012，34(3)：118-121.

The Method for Choosing Regularization Parameters Based on a Model Function and the L-Curve

HU Bin[1]，XU Hui-lin[2]，WANG Ze-wen[1]，YU Jian-hua[1]
(School of Science，East China Institute of Technology，Nanchang Jiangxi 330013，China;
2. School of Mathematics and Information Science，Henan Polytechnic University，Jiaozuo Henan 454000，China)

Abstract: Based on the model function method，the modified L-curve principle is presented and a simple corresponding iteration method for choosing regularization parameters is given. Furthermore，the simple iteration method for choosing regularization parameters is proved to be local convergence under some conditions. The method is locally efficient by numerical experiments.

Key words: L-curve principle; regularization method; regularization parameter; model function

(责任编辑：曾剑锋)